

Las redes de Bravais: Un análisis vectorial

Nicolas Mantilla Molina*
Santiago Andrés Montes Camacho**
Universidad Industrial de Santander
Bucaramanga

28 de octubre de 2022

Índice

1. Introducción	2
2. Metodología	3
3. El análisis y los resultados	4
3.1. Redes y celdas primitivas en 2D	4
3.2. Volúmenes de las 14 redes de Bravais en 3D	5
3.3. Descripción de sistemas <i>bcc</i> y <i>fcc</i>	6
3.4. Red recíproca	7
3.4.1. Cubo simple	7
3.4.2. Cara centrada 1.	9
3.4.3. Cara centrada 2.	9
3.4.4. Cuerpo centrado.	9
4. Conclusiones y Recomendaciones	10

* e-mail: nicolas2210707@correo.uis.edu.co, código: 2210707

** e-mail: santiagoamontes@gmail.com, código: 2210718

Resumen

Representar la información de una distribución ordenada es de gran importancia para la descripción de estructuras, fenómenos u entes matemáticos que se rigen por ello, resultando de gran utilidad en campos como lo es la física del estado sólido. Esta información se expresa mediante el concepto de red de Bravais, englobando una distribución de nodos los cuales actuarán como puntos de localización dentro de la red descrita. En estas, puede establecerse una base a partir de la cual representar el contenido de la red, llevándose esto a cabo mediante celdas primitivas que deben cumplir con una propiedad de simetría bajo traslaciones sobre la malla.

En este caso, los vectores juegan un papel fundamental durante la determinación de una celda primitiva, puesto que estas son formadas por vectores (denominados vectores primitivos) linealmente independientes, cuya combinación lineal (llevando a cabo escalamientos enteros de las componentes del vector) garantiza la generación de los diferentes nodos.

En este sentido, se empleará el uso de vectores para el estudio de las redes de Bravais, debido a brinda la posibilidad de ahondar en su composición de una manera más formal y sencilla, abarcando la formación de celdas primitivas, las diferentes configuraciones que pueden hallarse de estas en redes en dos y tres dimensiones; así como la relación que puede hallarse entre las distribuciones de redes tridimensionales y sus recíprocas respectivas. Estas últimas serán abordadas bajo definiciones previamente establecidas, por lo que no se ahondará en su implicancia o significancia abstracta.

1. Introducción

Es fácil ver que los vectores sencillos de \mathbb{R}^2 y \mathbb{R}^3 tienen una innumerable cantidad de aplicaciones practicas en la vida cotidiana. En este caso se estará analizando, de una manera gráfica y analítica, su utilidad en las redes de Bravais, empleadas con mucha frecuencia en cristalografía, física de estado sólido, arte, análisis atómico, entre otros[1].

De esta forma, pueden extrapolarse estas redes a diferentes dimensiones del espacio, lo cual dependerá del número de vectores linealmente independientes que actúen como vectores primitivos de la celda primitiva de la red. Para el caso de tres dimensiones, suelen visualizarse las celdas bajo diferentes configuraciones las cuales generaran cada una de las redes de Bravais. Esencialmente, son categorizadas 14 de estas, las cuales pueden ser visualizadas en la figura 1.

En este sentido, se parte del concepto de red, la cual puede visualizarse como la idea abstracta de la distribución de nodos, cumpliendo con ello ciertas propiedades de simetría tras aplicar procesos de

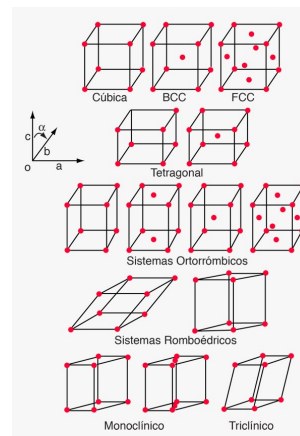


Figura 1: Redes de Bravais en tres dimensiones.

traslación.

Asimismo, estas redes pueden estudiarse partiendo de una pequeña estructura denominada celda unidad, la cual va a caracterizar a la distribución homogénea de la red en el sentido que, podrá completarla en su "totalidad" (suponiendo celdas y nodos infinitos) sin generar espacios o solapamientos entre nodos. Esta misma celda unidad, puede entenderse como primitiva teniendo en cuenta la relación entre los nodos que componen la celda y aquellas que comparten cada punto[2].

2. Metodología

En este sentido, será abordado el entendimiento de esas redes tomando como consideración la generación de sus celdas unidad a partir de vectores primitivos dados por la dimensión del espacio considerado. En este sentido, cada punto de la red correspondería a una combinación lineal de cada uno de estos vectores, siendo escalados por medio de números enteros.

Asimismo, se abordará el entendimiento de las celdas primitivas mediante el análisis de los diferentes vectores primitivos que sean posibles hallar a partir de una configuración bidimensional dada [2a]. Esto permitirá comprender las implicaciones de cada distribución que sea asignada como celda, y entender cómo poder identificarlas para describir cada elemento expresado en una red. Sumado a ello, se aplicará un proceso similar con cuatro ilustraciones artísticas [2b] al igual que cuatro teselados de M.C. [2c]. Tales composiciones cuentan en su estructura aparente un grado de simetría evidente, el cual podrá ser determinado e igualmente descrito en tal proceso.

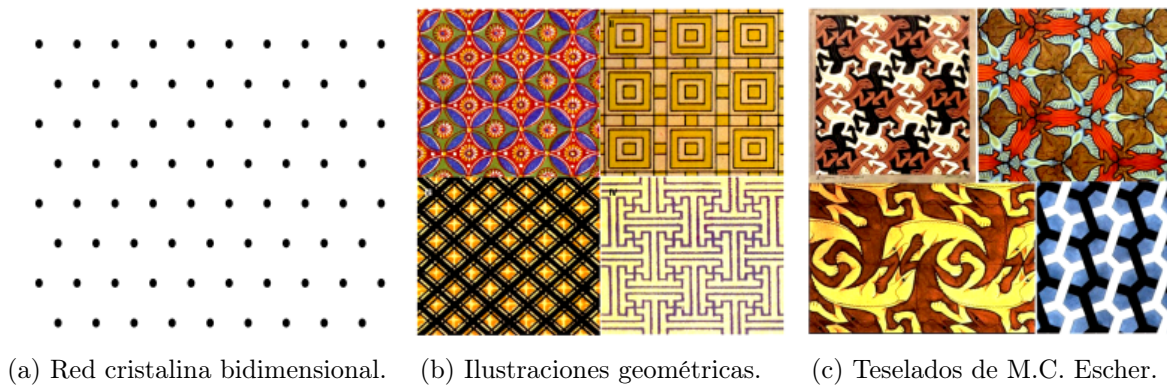


Figura 2: Visualizaciones de información distribuida en una red abstracta.

Por otra parte, resulta también importante el estudio de estas redes formadas por tres vectores primitivos linealmente independientes, en donde la distribución generada por ellos puede visualizarse a través de una red tridimensional, con celdas espaciales cuyos volúmenes pueden ser calculados dependiendo la configuración optada. Similarmente, puede llevarse a cabo este proceso con las redes

recíprocas de algunas de estas configuraciones.

3. El análisis y los resultados

3.1. Redes y celdas primitivas en 2D

En primera instancia, fueron estudiados los diferentes vectores primitivos posibles de generar distribuciones distintas sobre la red 2a, obteniendo así las celdas representadas en la figura 3.

Para este caso, pueden considerarse vectores primitivos a aquellos consecutivos sobre cada celda cuyo vértice en común corresponde al mismo nodo. Asimismo, debe entenderse que, cada una de estas configuraciones bidimensionales cumple con simetría traslacional, de manera que siguen generando la distribución dada por los nodos en la red para cualquier traslación efectuada sobre cualquier combinación lineal de los vectores primitivos de cada celda.

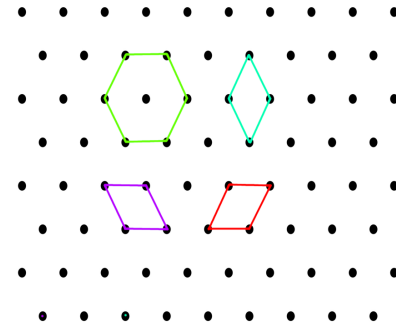
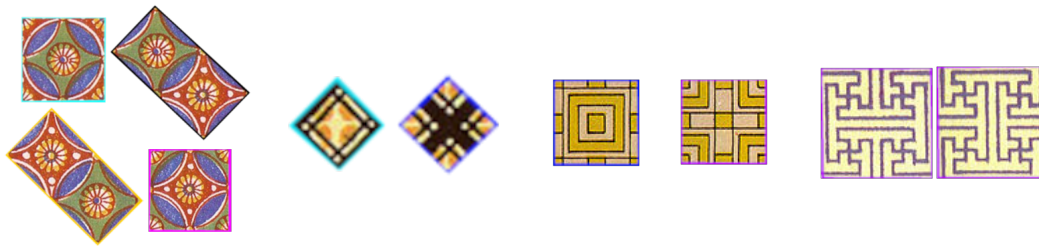


Figura 3: Celdas primitivas de la red cristalina bidimensional.

Seguidamente, fueron analizadas las figuras visualizadas en 2b y 2c, estableciendo las celdas que permiten generar todo el cuadro ilustrado, lo cual puede contemplarse en las figuras 4 y 5. Cabe resaltar que, en este caso se busca representar la información comprendida en cada ilustración artística, por lo que el objetivo recae en poder establecer su información contenida mediante una red abstracta, a partir de la cual se le será asociada una celda primitiva. Cada una de ellas establecen diferentes bases entre sí, sin embargo cada una de ellas permite formar una red de Bravais a partir de la cual son generadas las ilustraciones en cuestión.



(a) Celdas primitivas para mural egipcio. (b) Celdas primitivas para mural asirio. (c) Celdas primitivas para mural tahití. (d) Celdas primitivas para mural egipcio.

Figura 4: Celdas primitivas de murales artísticos.

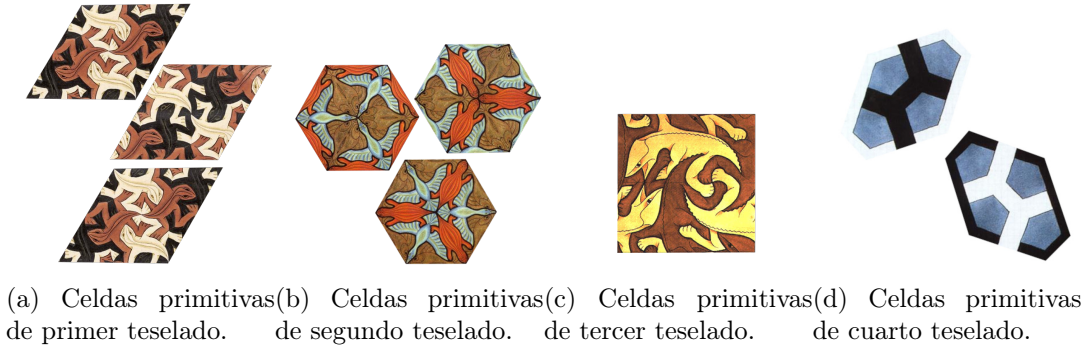


Figura 5: Celdas primitivas de teselados de M.C. Escher.

3.2. Volúmenes de las 14 redes de Bravais en 3D

Posteriormente, es abordado el estudio de las celdas primitivas en redes de Bravais tridimensionales, las cuales fueron mencionadas en 1, encontrando los volúmenes de cada celda correspondiente.

Esencialmente, partiendo de que los vectores primitivos de la red no son coplanares, es decir, no son linealmente dependientes, es garantizable que el determinante formada por sus componentes será equivalente a un número diferente de cero. En este caso, tal número corresponderá al volumen del sólido formado. De esta manera, definiendo tres vectores $c = c^i \hat{e}_i$, $b = b^i \hat{e}_i$ y $a = a^i \hat{e}_i$, se tiene la matriz:

$$A = \begin{pmatrix} c_1 & c_2 & c_3 \\ a_1 & a_2 & a_3 \\ b_1 & b_2 & b_3 \end{pmatrix}. \quad (1)$$

En este caso, es posible hallar la matriz transpuesta A^T y efectuar el producto matricial:

$$A_i^j (A^T)_j^i = \begin{pmatrix} c_i c^i & a_i c^i & b_i c^i \\ a_i c^i & a_i a^i & a_i b^i \\ b_i c^i & a_i b^i & b_i b^i \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} |c| & |a||c| \cos \beta & |b||c| \cos \alpha \\ |a||c| \cos \beta & |a| & |a||b| \cos \gamma \\ |b||c| \cos \alpha & |a||b| \cos \gamma & |b| \end{pmatrix} \quad (2)$$

Ahora bien, partiendo del hecho de que

$$Det(A_i^j (A^T)_j^i) = Det(A_i^j) Det((A^T)_j^i), \quad (3)$$

$$Det(A_i^j) = Det((A^T)_j^i), \quad (4)$$

puede expresarse el volumen de la configuración dada mediante

$$V = \sqrt{Det(A_i^j) Det(A_i^j)} = \sqrt{Det(A_i^j (A^T)_j^i)}. \quad (5)$$

De esta manera, las distintas distribuciones de los vectores A,B y C pueden ser descritas en función de sus ángulos y sus normas a partir de 2 y 3.

Obteniendo así:

- $V = abc = \sqrt{1 - \cos \alpha^2 - \cos \beta^2 - \cos \gamma^2 + 2 \cos \alpha \cos \beta \cos \gamma}$ para una distribución en la que $\alpha \neq \beta \neq \gamma \neq 90^\circ$, denominada triclinica.
- $V = abc \sin \beta$ para una distribución en la que $\beta \neq \alpha = \gamma = 90^\circ$, denominada monoclinica.
- $V = abc$ para una distribución donde $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$, denominada ortorrómbica.
- $V = a^2c$ para una distribución donde $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$ y $a = b$, denominada tetragonal.
- $V = a^3 \sqrt{1 - 3 \cos \alpha^2 + 2 \cos \alpha^3}$ para una distribución donde $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$ y $a = b = c$, denominada rombohedrica.
- $V = \frac{\sqrt{3}}{2} a^2c$ para una distribución en la que $\alpha = \beta = 90^\circ$, $\gamma = 120^\circ$ y $a = b$, denominada hexagonal.
- $V = a^3$ para una distribución en la que $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$ y $a = b = c$, denominada cúbica.

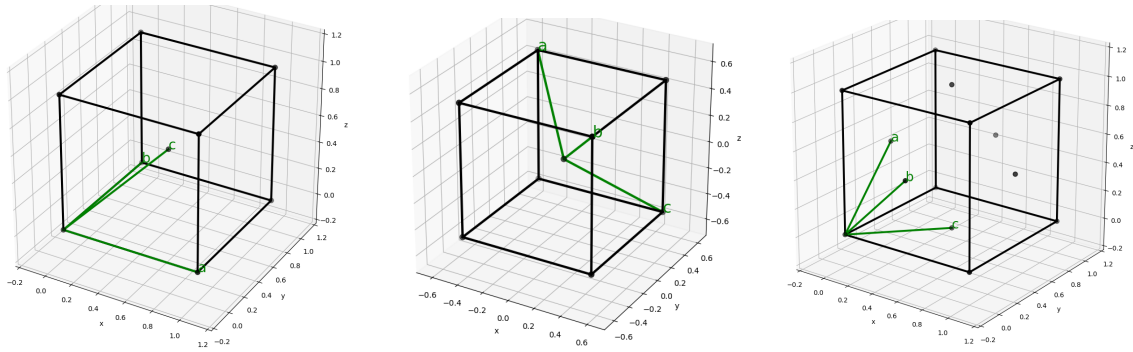
3.3. Descripción de sistemas *bcc* y *fcc*

Seguidamente, se llevó a cabo el análisis de los sistemas cúbicos de cara centrada y cuerpo centrado, los cuales pueden ser descritos mediante los vectores:

1. $\mathbf{a} = a\hat{\mathbf{i}}, \mathbf{b} = a\hat{\mathbf{j}}, \mathbf{c} = \frac{1}{2}a(\hat{\mathbf{i}} + \hat{\mathbf{j}} + \hat{\mathbf{k}})$
2. $\mathbf{a} = \frac{1}{2}a(\hat{\mathbf{j}} + \hat{\mathbf{k}} - \hat{\mathbf{i}}), \mathbf{b} = \frac{1}{2}a(\hat{\mathbf{k}} + \hat{\mathbf{i}} - \hat{\mathbf{j}}), \mathbf{c} = \frac{1}{2}a(\hat{\mathbf{i}} + \hat{\mathbf{j}} - \hat{\mathbf{k}})$
3. $\mathbf{a} = \frac{1}{2}a(\hat{\mathbf{j}} + \hat{\mathbf{k}}), \mathbf{b} = \frac{1}{2}a(\hat{\mathbf{i}} + \hat{\mathbf{k}}), \mathbf{c} = \frac{1}{2}a(\hat{\mathbf{i}} + \hat{\mathbf{j}}),$

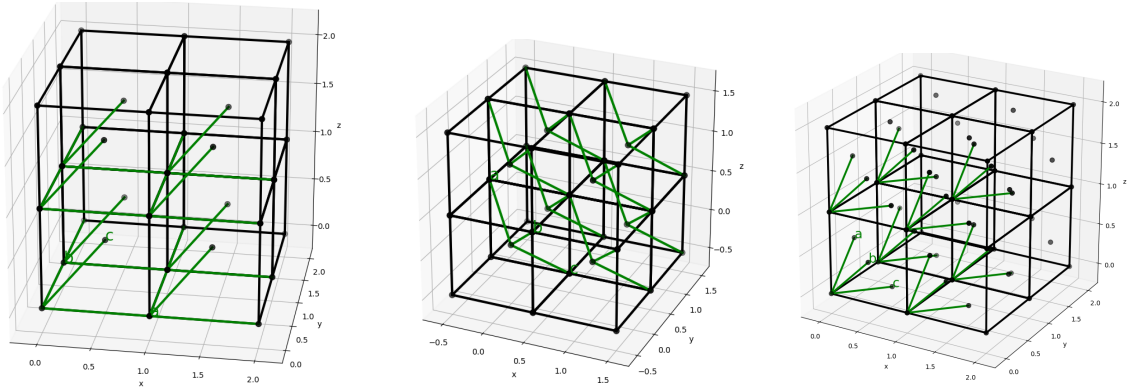
donde 1 y 2 generan una celda cúbica de cuerpo centrado y 3 una celda cúbica de cara centrada. Esto es posible de visualizar en la figura 6.

Asimismo, puede ilustrarse la red generada por cada una de estas celdas primitivas mediante la figura 7. Es importante destacar que si bien la magnitud del volumen en cada una de ellas es equivalente ($V = a^3$), el volumen V_p formado por el paralelepípedo compuesto de cada uno de los vectores primitivos resulta ser el mismo en una distribución cúbica concreta. Para el caso de una configuración *bcc* resulta $V_p = \frac{a^3}{2}$, y para *fcc* equivale $V_p = \frac{a^3}{4}$.



(a) Celda unitaria *bcc* a partir de los vectores 1. (b) Celda unitaria *bcc* a partir de los vectores 2. (c) Celda unitaria *fcc* a partir de los vectores 3.

Figura 6: Sistemas cúbicos con cara centrada y cuerpo centrado.



(a) Red generada por la celda primitiva 6a. (b) Red generada por la celda primitiva 6b. (c) Red generada por la celda primitiva 6c.

Figura 7: Redes de Bravais generadas por celdas primitivas de sistemas cúbicos con cara centrada y cuerpo centrado.

3.4. Red recíproca

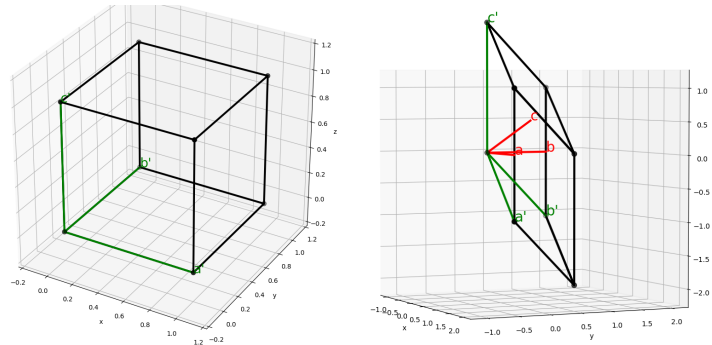
Por otra parte, pueden construirse vectores recíprocos bajo el análisis planteado anteriormente para los sistemas cubo simple, cubo cuerpo centrado y cubo cara centrada, con el fin de reconocer sus celdas primitivas y sus respectivos volúmenes, para poder comparar estos sistemas con los originales.

3.4.1. Cubo simple

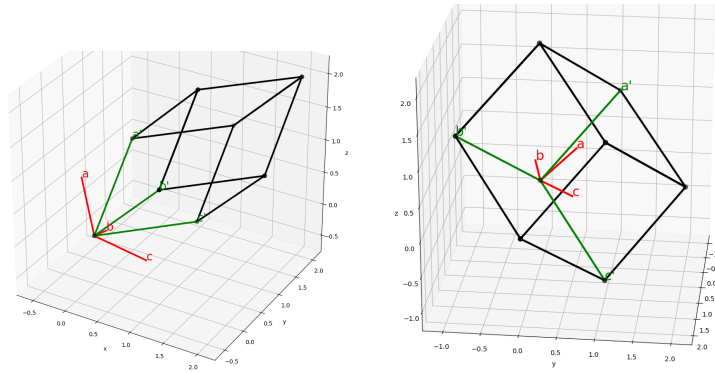
Primero, se parte definiendo los vectores que generan la red del sistema, en este caso:

$$\mathbf{a} = a\hat{\mathbf{i}}, \mathbf{b} = a\hat{\mathbf{j}}, \mathbf{c} = a\hat{\mathbf{k}}. \quad (6)$$

Ahora, creamos los vectores para la red recíproca, donde:



(a) Celda primitiva recíproca sistema cúbico simple. (b) Celda primitiva recíproca sistema cuerpo centrado.



(c) Celda primitiva recíproca sistema cuerpo centrado. (d) Celda primitiva recíproca sistema cara centrada.

Figura 8: Redes de Bravais recíprocas generadas por celdas primitivas de diferentes sistemas cúbicos (a. simple, b. y c. *bcc* y d. *fcc*). En todos los casos, $a = 1$

$$\mathbf{a}' = \frac{1}{a}\hat{\mathbf{i}}, \mathbf{b}' = \frac{1}{a}\hat{\mathbf{j}}, \mathbf{c}' = \frac{1}{a}\hat{\mathbf{k}}. \quad (7)$$

A partir de estos vectores se puede crear la celda primitiva que define la red, como se puede ver en la figura 8a. Además, se puede calcular el volumen de esta celda a partir del triple producto de sus vectores, en cuyo caso:

$$\mathbf{a}' \cdot (\mathbf{b}' \times \mathbf{c}') = \frac{1}{a^3}, \quad (8)$$

donde se evidencia con facilidad, que es el inverso del volumen de la celda original $\mathbf{a} \cdot (\mathbf{b} \times \mathbf{c}) = a^3$.

3.4.2. Cara centrada 1.

Se definen los vectores que generan la red del sistema, en este caso:

$$\mathbf{a} = a\hat{\mathbf{i}}, \mathbf{b} = a\hat{\mathbf{j}}, \mathbf{c} = \frac{a}{2}(\hat{\mathbf{i}} + \hat{\mathbf{j}} + \hat{\mathbf{k}}). \quad (9)$$

Ahora, se crearon los vectores para la red recíproca, donde:

$$\mathbf{a}' = \frac{1}{a}\hat{\mathbf{i}} - \frac{1}{a}\hat{\mathbf{j}}, \mathbf{b}' = \frac{1}{a}\hat{\mathbf{j}} - \frac{1}{a}\hat{\mathbf{k}}, \mathbf{c}' = \frac{2}{a}\hat{\mathbf{k}}. \quad (10)$$

A partir de estos vectores se puede crear la celda primitiva que define la red, como se puede ver en la figura 8b. Además, se puede calcular el volumen de esta celda a partir del triple producto de sus vectores, en cuyo caso:

$$\mathbf{a}' \cdot (\mathbf{b}' \times \mathbf{c}') = \frac{2}{a^3}, \quad (11)$$

donde se evidencia con facilidad, que es el inverso del volumen de la celda original $\mathbf{a} \cdot (\mathbf{b} \times \mathbf{c}) = \frac{a^3}{2}$.

3.4.3. Cara centrada 2.

Se empieza definiendo los vectores que generan la red del sistema, en este caso:

$$\mathbf{a} = \frac{a}{2}(-\hat{\mathbf{i}} + \hat{\mathbf{j}} + \hat{\mathbf{k}}), \mathbf{b} = \frac{a}{2}(\hat{\mathbf{i}} - \hat{\mathbf{j}} + \hat{\mathbf{k}}), \mathbf{c} = \frac{a}{2}(\hat{\mathbf{i}} + \hat{\mathbf{j}} - \hat{\mathbf{k}}). \quad (12)$$

Ahora, creamos los vectores para la red recíproca, donde:

$$\mathbf{a}' = \frac{1}{a}(\hat{\mathbf{j}} + \hat{\mathbf{k}}), \mathbf{b}' = \frac{1}{a}(\hat{\mathbf{i}} + \hat{\mathbf{k}}), \mathbf{c}' = \frac{1}{a}(\hat{\mathbf{i}} + \hat{\mathbf{j}}). \quad (13)$$

A partir de estos vectores se puede crear la celda primitiva que define la red, como se puede ver en la figura 8c. Además, se puede calcular el volumen de esta celda a partir del triple producto de sus vectores, en cuyo caso:

$$\mathbf{a}' \cdot (\mathbf{b}' \times \mathbf{c}') = \frac{2}{a^3}, \quad (14)$$

donde se evidencia con facilidad, que es el inverso del volumen de la celda original $\mathbf{a} \cdot (\mathbf{b} \times \mathbf{c}) = \frac{a^3}{2}$. Además, este resultado tiene el mismo valor que el anterior, el cual, a su vez, es de tipo *bcc*.

3.4.4. Cuerpo centrado.

Se comienza definiendo los vectores que generan la red del sistema, en este caso:

$$\mathbf{a} = \frac{a}{2}(\hat{\mathbf{j}} + \hat{\mathbf{k}}), \mathbf{b} = \frac{a}{2}(\hat{\mathbf{i}} + \hat{\mathbf{k}}), \mathbf{c} = \frac{a}{2}(\hat{\mathbf{i}} + \hat{\mathbf{j}}). \quad (15)$$

Ahora, se crean los vectores para la red recíproca, donde:

$$\mathbf{a}' = \frac{1}{a}(-\hat{\mathbf{i}} + \hat{\mathbf{j}} + \hat{\mathbf{k}}), \mathbf{b}' = \frac{1}{a}(\hat{\mathbf{i}} - \hat{\mathbf{j}} + \hat{\mathbf{k}}), \frac{1}{a}(\hat{\mathbf{i}} + \hat{\mathbf{j}} - \hat{\mathbf{k}}). \quad (16)$$

A partir de estos vectores se puede crear la celda primitiva que define la red, como se puede ver en la figura 8d. Además, se puede calcular el volumen de esta celda a partir del triple producto de sus vectores, en cuyo caso:

$$\mathbf{a}' \cdot (\mathbf{b}' \times \mathbf{c}') = \frac{4}{a^3}, \quad (17)$$

donde se evidencia con facilidad, que es el inverso del volumen de la celda original $\mathbf{a} \cdot (\mathbf{b} \times \mathbf{c}) = \frac{a^3}{4}$. Además, este resultado tiene el mismo valor distinto a los dos anteriores, lo cual puede ser consecuencia de que sea un sistema diferente (*fcc*).

4. Conclusiones y Recomendaciones

Partiendo de los resultados obtenidos durante en análisis, es posible verificar la relación entre la combinación lineal de dos vectores (o tres, dependiendo el espacio) primitivos que generan una celda para una red dada, hallando que efectivamente es posible localizar diferentes puntos sobre esta partiendo de la base considerada. Asimismo, se muestra cómo partiendo de una misma información a representar, es posible determinar diferentes celdas primitivas que se asocian a diferentes configuraciones de red, siendo todas válidas en el sentido que cumplen con la simetría traslacional al igual que generan la información dada.

Por otra parte, es importante destacar la presencia de iguales magnitudes de volumen del paralelepípedo formado por los vectores primitivos de cada una de las configuraciones *bcc*, por lo que sería óptimo estudiar este comportamiento para otros casos similares, con el fin de establecer una relación más sólida, y de igual manera extrapolarlo a configuraciones cúbica simple y *fcc*. Algo similar acontece con las redes recíprocas, siendo su volumen el inverso al de su red correspondiente, por lo que estudiar este fenómeno para más configuraciones brindaría una gran variedad de ejemplos que permitan evidenciar si esta situación se presenta en todos los escenarios que siguen estas condiciones.

Referencias

- [1] Howard D Flack. The revival of the bravais lattice. *Acta Crystallographica Section A: Foundations and Advances*, 71(2):141–142, 2015.
- [2] Mario Pitteri and Giovanni Zanzotto. On the definition and classification of bravais lattices. *Acta Crystallographica Section A: Foundations of Crystallography*, 52(6):830–838, 1996.